



TITLE:

構造物の非線形解析における多元連立方程式の数値解法 (数値計算のアルゴリズム)

AUTHOR(S):

林, 正

CITATION:

林, 正. 構造物の非線形解析における多元連立方程式の数値解法 (数値計算のアルゴリズム). 数理解析研究所講究録 1976, 269: 115-132

ISSUE DATE:

1976-04

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/105894>

RIGHT:

構造物の非線形解析における 多元連立方程式の数値解法

阪大 工学部 林 正

1. まえがき

有限要素法による構造物の解析において現われる多元連立方程式の解を求めることは、線形問題ではそれほど困難なことではない。これは、構造物が安定であれば、連立1次方程式の係数行列は正値であり、特異性もなく、かつ、解の唯一性も保証されるからである。しかし、非線形問題においては、解の唯一性が成立たず、線形化した連立方程式の係数行列は擬特異や正値でない(negative definite)場合も起り、計算が難しくなる。さらに、非線形連立方程式の解を逐次近似法によって求めるために、計算速度、精度、記憶容量に対する条件が厳しくなり、多次元の非線形問題を効率よく処理するプログラムを作ることは容易なことではない。

本文では、構造物の非線形問題が数学的モデルとして定式化された多元連立非線形方程式を、その物理的な性質を考慮して解析する方法を、二、三紹介する。

2. 構造物の非線形解析

(1) 非線形問題

構造物の非線形問題には、周知のように幾何学的非線形問題（いわゆる有限変位問題）と材料非線形問題とがある。数学的モデルとしては、種々のタイプがある前者の方が面白いので、本文では前者の問題に現われる方程式の解法を説明する。

幾何学的非線形問題は、図-1に示すような4つのタイプがあり、これらを増加型、減少型、分岐型、極値型と呼ぶことにする^{注1)}。

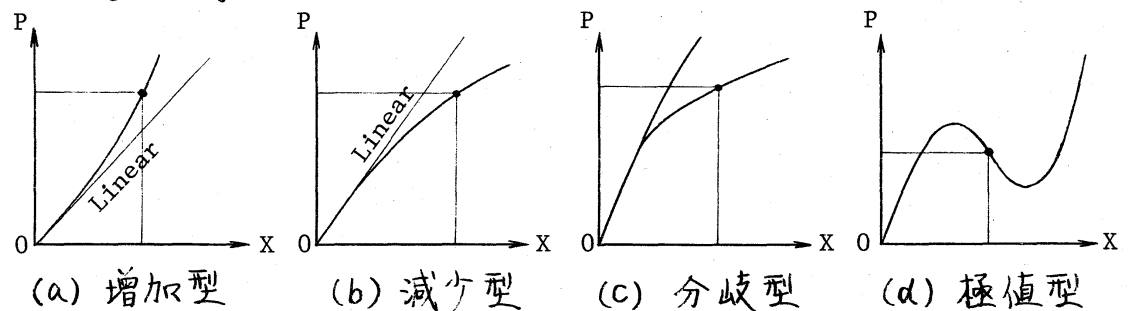


図-1 非線形問題の形式

図(a)の場合は、係数行列は状態の良い (well-conditioned) 行列であるが、図(c), (d)の場合には擬特異 (ill-conditioned) になったり^{注2)}、さらに(d)では negative definite になったりする。

注1) 屈服現象は、極値型に含めて考えることにする。

注2) 理論的には特異の状態があるが、数値的には殆んど起らない。

(2) 数値解法

非線形方程式の解法には、区分的に線形化した方程式を繰返して解き、解を収束させる逐次近似法を用いる。具体的には、連続して変化する定数項（通常は荷重ベクトル）に対する解（変位ベクトル）を求めるためと、ある特定の解に収束させるために、次の①、②の解法を併用した混合法を用いる。

① 反復法 — Newton-Raphson法, 変形 Newton-Raphson法.

② 増分法 — 荷重増分法, 変位増分法.

連立1次方程式の数値解法には種々の方法があるが、後述べる制約条件のために、次の3つの方法を用いた。

① 対称帯行列に対する Gauss の消去法.

② 変形 Cholesky 法 (square-root-free Cholesky's method).

③ 非零の小行列のみを用いた共役勾配法 (block-code-matching conjugate gradient method).

(3) 多元連立1次方程式

構造解析における連立1次方程式の係数行列は、次のような性質を有している。

① 対称な帯行列である。

② 一般にスパースな行列であり、ブロック疎行列である。

③ 通常は正值行列であるが、高度の非線形問題では擬特異や正值でない場合がある。

多元連立非線形方程式を解くためには、プログラムの開発において、計算速度、精度、記憶容量について特に配慮しなければならない。これには、次のような条件が考えられる。

- ① 反復計算を行なうために、計算速度が速いこと。
- ② 収束計算を行なうために、行列が悪化した場合にも安定な解が得られるために、精度の良い解法であること。
- ③ 多次元行列の演算を高速で行なうために、イン・コアのみで処理すること。

上記の条件により、1メガバイトの記憶容量を有する計算機を用いた場合、2~3千円までの連立方程式が計算の対象になる。連立1次方程式の解の精度は、5桁とする^{注)}。

3. 連立1次方程式の解法

連立1次方程式を解くプログラムの作成において、配慮したことを列挙しておく¹⁾。基本的なアルゴリズムについては、省略する^{2)~5)}。

(1) Gaussの消去法, 変形Cholesky法

- ① 消去すべき要素が零とみなせるときには、その行の掃出しを省略して計算時間の短縮をはかる。
- ② 消去の過程において主小行列式の符号を調べ、行列の

注) 48 bits/word の計算機を用いた場合。

正, 負の判定を行なう。

③ pivot の値により, 桁落ちのチェックを行なう。

また, 消去法には直接関係しないが,

④ 境界条件に関する式 (係数行列の行) はそのまま残しておき, 要素を零に置き換えることにより行列を縮小しない。これは①の手法にも関係する。また, この手法は, 次の共役勾配法でも用いる。

(2) 共役勾配法

記憶容量を節約するために, 要素の行と列番号はブロック単位 (小行列の番号) で記憶する。構造物においては, この行と列番号は部材の端の節点番号に一致するので, あらかじめ記憶する必要はない。このために, ④の手法が必要である。

4. 連立非線形方程式の解法

(1) Newton-Raphson 法

構造解析に現われる非線形な n 元連立方程式を

$$F(X, \lambda) = K(X) - \lambda P = 0 \quad (1)$$

と書く。ここに, K は非線形な剛性行列, X は変位ベクトル, P は荷重ベクトルを表わし, λ は荷重パラメータでスカラー量である。また, P は定数ベクトルである。

いま, 第 i 段階までの増分が完了し, そのとまに作用して

いる荷重を $\Lambda_i P$, 生じた変位を X_i とすると, 次式が成立する。

$$F(X_i, \Lambda_i) = 0 \quad (2)$$

次に, 第 $i+1$ 段階の増分における荷重パラメータの増分を λ_{i+1} , 変位増分を x_{i+1} とする。

a) 荷重増分法を併用した場合には Λ は既知であるから, この増分段階において, 式 (2) を次式のように線形化する。

$$F(X_{i+1}, \Lambda_{i+1}) \doteq F(X_i, \Lambda_{i+1}) + J(X_i) \cdot x_{i+1} \quad (3)$$

ここに,

$$X_{i+1} = X_i + x_{i+1}, \quad \Lambda_{i+1} = \Lambda_i + \lambda_{i+1} \quad (4)$$

であり, $J(X_i)$ は X_i における F のヤコビ行列である。

$$J(X) = [\partial F / \partial X] \quad (5)$$

式 (3) の右辺を 0 とおけば, 第 k 回目反復による解を $x_{i+1}^{(k)}$ とし, Newton-Raphson 法の反復公式が得られる。

$$x_{i+1}^{(k+1)} = x_{i+1}^{(k)} - [J(X_{i+1}^{(k)})]^{-1} \cdot F(X_{i+1}^{(k)}, \Lambda_{i+1}) \quad (6)$$

ただし,

$$X_{i+1}^{(k)} = X_i + x_{i+1}^{(k)} \quad (7)$$

b) 式 (1) において, X の第 j 要素 X_j を既知とし, Λ が未知の場合を考える。記号の混乱を避けるために,

$$X_j = \Delta \quad (8)$$

とおく。また, 未知ベクトルを

$$\tilde{X} = (X_1, \dots, X_{j-1}, \Lambda, X_{j+1}, \dots, X_n)^T \quad (9)$$

とおけば, 式 (1) は

$$F(\tilde{X}, \Delta) = 0 \quad (10)$$

と書ける。前述と同じ手順により、第 $i+1$ 段階の増分における Newton-Raphson 法の反復式は次のようになる。

$$\tilde{x}_{i+1}^{(k+1)} = \tilde{x}_{i+1}^{(k)} - [\tilde{J}(\tilde{x}_{i+1}^{(k)})]^{-1} \cdot F(\tilde{x}_{i+1}^{(k)}, \lambda_{i+1}) \quad (11)$$

ここに、 F のヤコビ行列 \tilde{J} は、式 (5) の J の第 i 列を $-P$ で置き換えたものである。

(2) 変形 Newton-Raphson 法

これは、反復のたびにヤコビ行列を計算し直さない方法である。すなわち、式 (6) または式 (11) において、

$$J(x_i) \quad \text{または} \quad \tilde{J}(\tilde{x}_i)$$

を用いる。

(3) 荷重増分法

式 (1) を正分的に線形化した式 (3) を用いて、与えられた荷重増分 λ に対する変位増分 x を求める方法である。

第 $i+1$ 回の荷重増分に対して、次式を用いる。

$$J(\bar{x}_i) \cdot x_{i+1} = \lambda_{i+1} P \quad (12)$$

\bar{x}_i は線形化による誤差を含んだ近似解であることを表わす。

前回までの計算誤差、すなわち不平衡力（残差ベクトル）を考慮した解法は修正荷重増分法といわれ、反復式は次式による。

$$J(\bar{x}_i) \cdot x_{i+1} = \lambda_{i+1} P - F(\bar{x}_i, \lambda_i) \quad (13)$$

式 (13) は、Newton-Raphson 法による反復計算を一回行、たのと同じものである。

(4) 変位増分法

式(1)における X のある特定の要素を変位パラメータとして扱い、計算を制御していく方法である。このとき、この特定の要素は既知であり、荷重パラメータ Λ は未知である。

式(10)を \tilde{X}_i のまわりで展開し、2次以上の項を省略すれば

$$F(\tilde{X}_{i+1}, \Delta_{i+1}) \doteq F(\tilde{X}_i, \Delta_{i+1}) + \tilde{J}(\tilde{X}_i) \cdot \tilde{\alpha}_{i+1} \quad (14)$$

となる。さらに、右辺第1項を Δ_i について展開すれば

$$F(\tilde{X}_i, \Delta_{i+1}) \doteq F(\tilde{X}_i, \Delta_i) + \delta_{i+1} \cdot f(\tilde{X}_i, \Delta_i) \quad (15)$$

ここに、 δ_{i+1} は第 $i+1$ 段階における変位パラメータ Δ の増分であり、 $f(\tilde{X}, \Delta)$ は式(5)の $J(X)$ の第 j 列に等しい。これを $J_j(X)$ とおけば

$$f(\tilde{X}, \Delta) = \frac{\partial F}{\partial \Delta} = \frac{\partial F}{\partial X_j} = J_j(X) \quad (16)$$

結局、式(12), (13)に対応する式は、 \bar{X}_i を \tilde{X}_i の近似解として、それぞれ式(17), (18)のようになる。

$$\tilde{J}(\bar{X}_i) \cdot \tilde{\alpha}_{i+1} = -\delta_{i+1} \cdot J_j(\bar{X}_i') \quad (17)$$

$$\tilde{J}(\bar{X}_i) \cdot \tilde{\alpha}_{i+1} = -\delta_{i+1} \cdot J_j(\bar{X}_i') - F(\bar{X}_i, \Delta_i) \quad (18)$$

ただし、 \bar{X}_i' の第 j 要素は δ_i である。

(5) 推定増分法^{6), 注)}

この方法は、混合法において反復計算を加速するために用いる方法である。すなわち、ある増分段階において反復計算

注) 適当な用語がないので、仮にこのように呼ぶことにする。

が終了し、次の増分に移るときに、未知の増分量を過去の増分段階において得られた解から外挿的に推定し、この推定値を第1近似解として(変形)Newton-Raphson法による反復計算を始める。

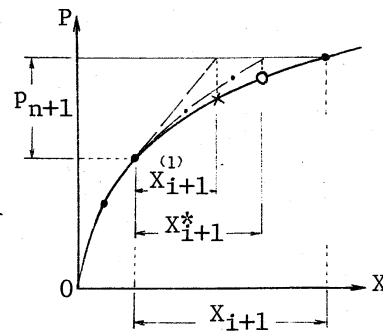


図-2 推定増分法

例えば、通常反復法ならば、式(6)による第1回目の反復公式は、

$$x_{i+1}^{(1)} = -[J(x_i)]^{-1} \cdot F(x_i, \lambda_{i+1}) \quad (19)$$

となるのに対して、推定増分法においては上式による計算を省略し、2回目の反復計算から始める。このときの計算式は

$$x_{i+1}^{(2)} = x_{i+1}^* - [J(x_{i+1}^*)]^{-1} \cdot F(x_{i+1}^*, \lambda_{i+1}) \quad (20)$$

となる。ここに、 x_{i+1}^* は推定値であり、 $x_{i+1}^* = x_i + \Delta x_{i+1}^*$ である。

式(20)から明らかのように、推定値が解のよい近似値であるならば、反復計算が一段と加速されることになる。解の推定には種々の公式を用いることができるが、簡単な2次または3次の多項式で近似した場合でも十分な効果を上げることができる⁶⁾。

5. 変位増分法のアルゴリズム

荷重増分法及びNewton-Raphson法のアルゴリズムについては、種々の文献^{7)~9)}で詳しく述べられているので省略することに

し、ここでは変位増分法についてのみ説明する。

式(12)と式(17)を比較すればわかるように、式(17)は形の上では式(12)の係数行列 \tilde{A} の第 j 列と右辺の定数ベクトル \mathbf{b} の符号を逆にして入れ換えたものである。ところがすでに述べたように、 \tilde{A} は対称な帯行列であるのに、 \tilde{A} は非対称で、かつ一般的には帯行列にはならない。したがって、式(17)または式(11)や式(18)をそのまま用いたのでは大次元行列の演算には極めて都合が悪いので、以下のようなアルゴリズムを用いる。

(1) 係数行列の1列と定数項を入れ換えた方程式の解

$$A = (a_1, a_2, \dots, a_j, \dots, a_n) \quad (21)$$

を係数行列とする連立1次方程式

$$Ax = b \quad (22)$$

において、係数行列の第 j 列と定数項を入れ換えた方程式を考える。すなわち、

$$\tilde{A}\tilde{x} = a_j \quad (23)$$

ここに、

$$\tilde{A} = (a_1, a_2, \dots, b, \dots, a_n) \quad (24)$$

この方程式(23)の解は、式(22)の解 x と、次式

$$Ay = a_j \quad (25)$$

の解 y を用いて、式(26)のようになる(証明は省略する)注。

注) $E_j = (e_1, e_2, \dots, x, \dots, e_n)$ (e_k :単位ベクトル) を用いれば

$$AE_j = \tilde{A} \quad \text{より} \quad \tilde{x} = E_j^T A^{-1} a_j = E_j^T y$$

$$\tilde{\alpha} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} - \frac{y_j}{z_j} \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ -1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \quad (26)$$

(2) 修正変位増分法アルゴリズム

式(13)の添字を省き、式(27)のように書き換える。ここに、 R は不平衡力(残差ベクトル)を表わす。

$$J \cdot \alpha = \lambda P - R \quad (27)$$

ここで、変位増分 α を2つのベクトルに分ける

$$\alpha = \pi + u \quad (28)$$

とおき、式(27)を2つの方程式に分解する。すなわち

$$J \cdot \pi = \lambda P \quad (29)$$

$$J \cdot u = -R \quad (30)$$

いま、式(27)において、 α の第 j 成分 α_j を既知とし、変位パラメータ δ を用いる

$$\alpha_j = t_j + u_j = \delta \quad (31)$$

とおく。 u_j は式(30)より求められるので、 $t_j = \delta - u_j$ を式(29)に代入して

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n (J_k \cdot t_k) - \lambda P = (u_j - \delta) J_j \quad (32)$$

または、

$$\tilde{J} \cdot \tilde{\pi} = (u_j - \delta) J_j \quad (33)$$

と書き換える。ここに、 \tilde{J} は J の第 j 列 J_j を $-P$ で置き換え

たものであり、 \tilde{x} は次の成分を持つ列ベクトルである。

$$\tilde{x} = (t_1, t_2, \dots, \lambda, \dots, t_n)^T \quad (34)$$

したがって、式(33)の解 \tilde{x} は

$$\tilde{J}w = P \quad (35)$$

$$\tilde{J}w = \tilde{J}_i \quad (36)$$

の解 w , w を用いて、式(26)より次のようになる。

$$\tilde{x} = \begin{Bmatrix} t_1 \\ \vdots \\ \lambda \\ \vdots \\ t_n \end{Bmatrix} = (u_i - \delta) \begin{Bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ w_n \end{Bmatrix} - (u_i - \delta) \frac{w_i}{v_i} \begin{Bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ v_n \end{Bmatrix} \quad (37)$$

式(37)から荷重パラメータ λ が求められるので、式(28)より変位増分 x は次のようになる。

$$x_k = \begin{cases} u_k + \lambda v_k + \beta w_k & (k \neq i) \\ \delta & (k = i) \end{cases} \quad (38)_{1,2}$$

ここに、

$$\lambda = -\beta w_i / v_i, \quad \beta = u_i - \delta \quad (39)_{1,2}$$

結局、式(27)の解 x と λ は、変位パラメータ δ の値を定めれば、3組の連立方程式(30), (35), (36)の解を用いて式(38), (39)により求めることができる。この3組の方程式の係数行列は同一な対称帯行列であるので、計算時間のロスは少ない。

(3) 混合法のアルゴリズム

式(38), (39)により得られた解を用いて不平衡力(残差ベクトル)を求め、次の変位増分に対する式(18)の計算、すなわ

ち上述の式(27)~(39)の計算を繰り返すが修正増分法である。

一方、反復法を併用してある増分段階で解を収束させる場合には、式(11)による反復計算を行なわなければならない。この収束計算に上述の計算手順を適用するには、まず与えられた増分量 δ に対する解の第1近似値 $\tilde{x}_{i+1}^{(1)}$ を式(38), (39)より求める。次に残差ベクトル $F(\tilde{x}_{i+1}^{(1)}, \Delta_{i+1})$ を求め、 $\delta=0$ として同じ計算手順を用いれば、 $\tilde{x}_{i+1}^{(2)}$ を求めることができる。ただし、この場合には式(7)の代りに次式を用いなければならない。

$$\tilde{x}_{i+1}^{(k)} = \tilde{x}_i + \sum_{k=1}^k \tilde{x}_{i+1}^{(k)} \quad (40)$$

6. 計算手法

(1) 解法の組合せ

種々の非線形問題を一つの解法のみで解くことは難しく、通常はそれぞれの問題を特別の問題として扱わなければならない。また、同じ解法原理を用いても、解の性質により計算の過程においては種々の技法を用いることが多い。一般的に、非線形性が強い程高度の技法を必要とするが、逆に非線形性が弱ければ簡単な計算手順を用いて計算時間の短縮を計るべきである。表-1に、非線形方程式の解法の組合せと、それに適応した連立1次方程式の解法を示した。本文では、2.の数値解法において述べた理由により、混合法のみを用いる。

表 - 1

mixed method		iterative method	
		Newton-Raphson's method	modified N-R. method
incremental method	load incremental method	Gauss' elimination meth. conjugate gradient meth.	modified Cholesky's meth.
	displacement incremental m.	Gauss' elimination meth.	modified Cholesky's meth.

非線形性が弱い場合には、変形 Newton-Raphson 法を用いる方が、Newton-Raphson 法を用いる場合よりも計算時間は短くなる。しかし、後で説明するように、この方法のみでは解が収束しない場合があるので注意を要する。

図 - 1 に示した 4 つの型式に対して各種の解法を用いた場合の計算上の技法を、以下に説明する。

(2) 増加型

この種の方程式は他の型式よりも解が求め易く、表 - 1 に示したすべての解法を用いることができる。

変形 Newton-Raphson 法を用いるときには、初期値のヤコビ行列を用いて収束計算を行なうよりも、1~2 回 Newton-Raphson 法による反復計算を行ってから、変形 Newton-Raphson 法を用いる

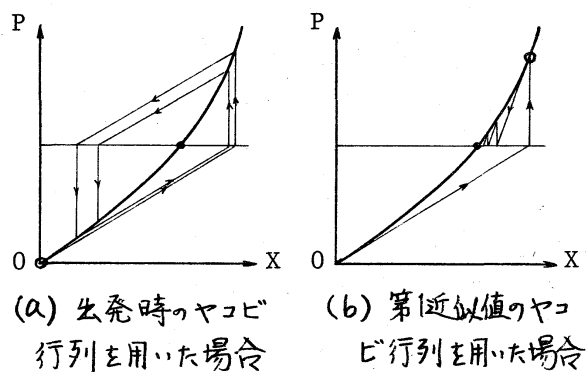


図 - 3 変形 N-R 法による収束状態の方が収束性が良い。この理由は、図 - 3 から理解できる。

上述のことは、他の型式についても言えることであって、

出発時の初期値と求める解の性状(解のモード)が異なる場合には、図(a)の方法では解を求めることは出来ない。

(3) 減少型

解が単調に変形する場合には、どの解法を用いてもよい。
ただし、非線形性が強くなると、CG法の繰返し回数は増加し、この種の問題には適用し難い。

増分法については、筆者の経験では荷重増分法よりも変位増分法の方が収束性は良好であった。

(4) 分岐型

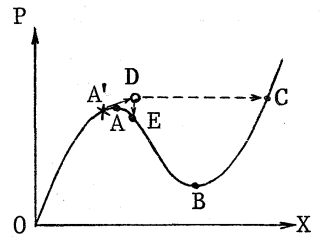
ある限界点において解が分岐する問題では、求めたい解の微小な成分(モード)を初期不整量として与える解法がよく用いられる。不整量としては、初期変位または初期荷重を用いる。この手法では、解の性状を事前に知る必要があるが、通常は物理的な性質から予測できる。

分岐後の解の性状が全く異なる場合に荷重増分法を用いると、分岐点の近くでは荷重増分量を極端に小さくしなければ解が収束しないことがある。このような問題では、変位増分法を用いると、増分量を小さくしなくても容易に解を求めることができる。

(5) 極値型

荷重増分法を用いた場合には、図-4のA-B間ではヤコビ

行列はnegative definite になるので、計算にはかなりの技巧を要する。通常荷重増分法では、極値点 A の少し手前の A' 点に達した



た後、荷重を増加すると D 点が計算される。図-4 極値型の計算
しかし、この点は方程式 $F=0$ を満足しないので、何回かの反復計算を行って C 点に飛び移る。したがって、 $A-B$ 間の解を求めるためにはヤコビ行列の正負の判定を行い、もし負になれば荷重を減少させる。図-4 では、 D 点から E 点に移ることになる。

そこで、問題は行列の正負の判定法であるが、計算時間に無駄が無く、精度も良い方法として主小行列式の符号を調べる方法を用いる。これには、Gauss の消去法または変形 Cholesky 法を用いて、pivot の符号を調べればよい。すべての pivot の値が正ならば、その行列は正值である。

もう一つの判定法として、二次形式の符号を調べる方法がある。すなわち、0 でない任意のベクトル y に対して (y, Jy) の符号を調べるのであるが、このとき、 y として式 (12) または式 (13) の x_{i+1} を用いれば、二次形式 (x_{i+1}, Jx_{i+1}) の計算をする代わりに右辺の荷重ベクトルとのスカラー積を求めればよいことになる。修正荷重増分法にこの方法を用いて、三本木がアーチの snap through の問題を解いている¹⁰⁾。

荷重増分法を用いた場合のもう一つの問題点は、極値点に近づいたときには荷重増分量を自動的に小さくするようにプログラムを作成する必要がある。この制御を変位の増分量で行なえば簡単であるが、荷重増分量で行なうとプログラムが多少面倒になる。また、荷重で制御すると、問題によっては、図-4においてD点からいきなりC点に飛び移ることもある。

したがって、極値型の問題では荷重増分法を用いるよりも変位増分法を用いる方がプログラムも簡単になり、収束性もずっと良くなる。変位増分法を用いれば行列の正負の判定をする必要はない。また、この方法によれば変形 Newton-Raphson 法を併用することが可能となり、計算時間を短縮することができる。

7. あとがき

本文は、構造物の非線形解析における代表的な問題についての数値解法を、筆者の経験からまとめたものである。本文で説明した手法は、構造物の他の非線形問題にも応用することができる。なお、数値計算例については、紙面の都合で割愛せざるをえなかった。

最後に、構造物の非線形問題に関して多大の御指導を戴いた本学の前田 幸雄 教授に深く謝意を表する次第である。

参考文献

- 1) 林 正：科学計算用サブプログラム・ライブラリ，大阪大学大型計算機センター・ニュース，No. 8，1972.
- 2) 平野菅保：多元連立1次方程式の精密な解き方，コンピュータによる構造工学講座Ⅱ-1-A，培風館，1971.
- 3) 戸川隼人：マトリックスの数値計算，オーム社，1971.
- 4) 新谷尚義：数値計算Ⅰ—線形計算—，朝倉書店，1967.
- 5) Forsythe, G.E. and C.B. Moler ; 渋谷・田辺共訳：計算機のための線形計算の基礎，培風館，1969.
- 6) 前田・林・中村：増分法による平面骨組構造物の大変形解析の加速計算法，土木学会論文報告集，No. 223，1974.
- 7) Desai, C.S. and J.F. Abel ; 山本善之訳：マトリックス有限要素法，科学技術出版社，1974.
- 8) Stricklin, J.A., W.A. Von Rieseemann, J.R. Tillerson and W.E. Haisler :
Static Geometric and Material Nonlinear Analysis, Advances in Computational Methods in Structural Mechanics and Design, The University of Alabama in Huntsville Press, 1972.
- 9) Gallagher, R.H. : Finite Element Analysis of Geometrically Nonlinear Problems, Theory and Practice in Finite Element Structural Analysis, University of Tokyo Press, 1973.
- 10) 三本木茂夫：梁および板の非線形解析，第五回マトリックス構造解析法研究発表論文集，日本鋼構造協会，1971.